



**(19) 대한민국특허청(KR)**  
**(12) 등록특허공보(B1)**

(45) 공고일자 2014년04월23일  
 (11) 등록번호 10-1388809  
 (24) 등록일자 2014년04월17일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
 C07C 13/62 (2006.01) C07C 211/61 (2006.01)  
 C07D 213/16 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)  
 (21) 출원번호 10-2012-7001395  
 (22) 출원일자(국제) 2012년04월27일  
 심사청구일자 2012년01월18일  
 (85) 번역문제출일자 2012년01월18일  
 (65) 공개번호 10-2012-0024979  
 (43) 공개일자 2012년03월14일  
 (86) 국제출원번호 PCT/JP2010/057841  
 (87) 국제공개번호 WO 2011/001741  
 국제공개일자 2011년01월06일  
 (30) 우선권주장  
 JP-P-2009-155667 2009년06월30일 일본(JP)  
 (56) 선행기술조사문헌  
 WO2008059713 A1  
 WO2008102740 A1  
 JP2010138086 A  
 JP2010138091 A

(73) 특허권자  
 캐논 가부시끼가이샤  
 일본 도쿄도 오오따꾸 시모마루쵸 3쵸메 30방 2고  
 (72) 발명자  
 가마따니 준  
 일본 1468501 도쿄도 오오따꾸 시모마루쵸 3쵸메 30방 2고 캐논 가부시끼가이샤 내  
 야마다 나오끼  
 일본 1468501 도쿄도 오오따꾸 시모마루쵸 3쵸메 30방 2고 캐논 가부시끼가이샤 내  
 사이또오 아끼히토  
 일본 1468501 도쿄도 오오따꾸 시모마루쵸 3쵸메 30방 2고 캐논 가부시끼가이샤 내  
 (74) 대리인  
 장수길, 박충범

전체 청구항 수 : 총 10 항

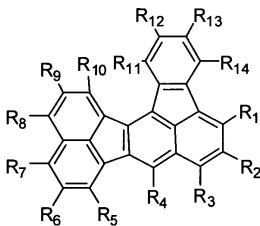
심사관 : 김은희

**(54) 발명의 명칭 신규 유기 화합물 및 유기 발광 소자**

**(57) 요약**

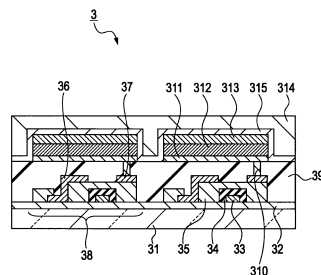
본 발명은 하기 화학식 1로 나타내어지는 인데노벤조[k]플루오란텐 유도체인 유기 화합물을 제공한다.

<화학식 1>



화학식 1에서, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>14</sub>는 각각 독립적으로 수소 원자, 할로젠 원자, 알킬기, 알콕시기, 아미노기, 아릴기 및 복소환기로부터 선택된다.

**대표도 - 도1**

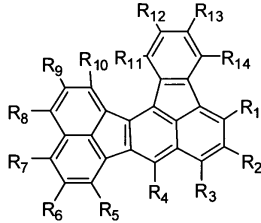


**특허청구의 범위**

**청구항 1**

하기 화학식 1로 나타내어지는 유기 화합물.

<화학식 1>



화학식 1에서, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>14</sub>는 각각 독립적으로 수소 원자, 불소 원자, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오란테닐기, 안트라세닐기, 피레닐기, 페난트레닐기, 벤조플루오로테닐기, 플루오레닐기, 피리딜기, 퀴놀릴기, 벤조이미다졸릴기, 트리아질기, 디페닐아미노기, 및 페녹시기로부터 선택되고, 상기 페닐기, 플루오란테닐기, 플루오레닐기, 디페닐아미노기 및 트리아질기는 치환기로서 탄소수 1 내지 4의 알킬기를 가질 수 있고,

상기 나프틸기, 안트라세닐기, 벤조플루오로테닐기 및 벤조이미다졸릴기는 치환기로서 페닐기를 가질 수 있다.

**청구항 2**

제1항에 있어서, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>14</sub>는 각각 독립적으로 수소 원자, 탄소수 1 내지 4의 알킬기, 페닐기, 나프틸기, 플루오란테닐기, 플루오레닐기, 피리딜기, 퀴놀릴기, 트리아질기, 벤조이미다졸릴기 및 디페닐아미노기로부터 선택되는 치환기인, 유기 화합물.

**청구항 3**

제1항에 있어서, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>14</sub>는 각각 독립적으로 수소 원자, 메틸기, t-부틸기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오란테닐기, 디페닐아미노기 및 피리딜기로부터 선택되는 치환기이고,

상기 페닐기는 치환기로서 메틸기 또는 t-부틸기를 가질 수 있고, 상기 나프틸기는 치환기로서 페닐기를 가질 수 있고, 상기 플루오란테닐기는 치환기로서 메틸기 또는 t-부틸기를 가질 수 있고, 상기 디페닐아미노기는 치환기로서 t-부틸기를 가질 수 있는 것인, 유기 화합물.

**청구항 4**

애노드, 캐소드, 및 상기 애노드와 캐소드 사이에 배치되는 유기 화합물층을 포함하는 유기 발광 소자이며, 상기 유기 화합물층은 제1항에 따른 유기 화합물을 함유하는 층을 적어도 1층 포함하는, 유기 발광 소자.

**청구항 5**

제4항에 있어서, 상기 유기 화합물층은 발광층인 유기 발광 소자.

**청구항 6**

제5항에 있어서, 청색광을 방출하는 유기 발광 소자.

**청구항 7**

제4항에 따른 유기 발광 소자 및 상기 유기 발광 소자의 발광 휘도를 제어하는 TFT 소자를 각각 갖는 복수의 화소를 포함하는 표시 장치.

**청구항 8**

표시부 및 활상부를 포함하는 활상 장치이며,

상기 표시부는 제4항에 따른 유기 발광 소자 및 상기 유기 발광 소자의 발광 휘도를 제어하는 TFT 소자를 각각 갖는 복수의 화소를 포함하고,

상기 활상부는 활상 광학계를 포함하는, 활상 장치.

**청구항 9**

제4항에 따른 유기 발광 소자를 포함하는 조명 장치.

**청구항 10**

제4항에 따른 유기 발광 소자를 포함하는 노광 광원을 포함하는 전자 사진 화상 형성 장치.

**명세서**

**기술분야**

[0001] 본 발명은 신규 유기 화합물 및 이 화합물을 포함하는 유기 발광 소자 및 화상 표시 장치에 관한 것이다.

**배경기술**

[0002] 유기 발광 소자는 애노드, 캐소드 및 상기 두 전극 사이에 배치되는 유기 화합물층을 각각 포함하는 소자이다. 전극으로부터 전자 및 정공이 주입되어 유기 화합물층 중의 발광성 유기 화합물의 여기자를 생성시키고, 이 여기자가 기저 상태로 복귀될 때 광이 방출된다.

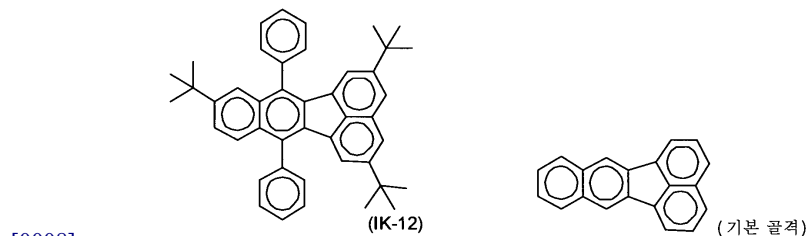
[0003] 유기 발광 소자는 "유기 일렉트로루미네센스 소자" 또는 "유기 EL 소자"로 칭해진다.

[0004] 최근, 유기 발광 소자에서의 현저한 진보로 인해, 저 인가 전압에서 고휘도, 발광 파장의 다양성 및 고속 응답성을 갖는 박형 및 경량의 발광 소자의 형성이 가능하게 되었다.

[0005] 유기 발광 소자는 화상 표시 장치 및 전자 사진 화상 형성 장치의 감광 부재를 노광하기 위한 노광 광원으로서 사용될 수 있다.

[0006] 지금까지 신규 발광성 유기 화합물이 창출되고 있다.

[0007] 예를 들어, 특허문헌 1에는 유기 화합물층으로서 기능하는 발광층을 구성하는 유기 화합물의 일례로서 하기에 나타낸 IK-12가 개시되어 있다. 이 화합물은 하기에 나타낸 벤조[k]플루오란텐을 기본 골격으로서 갖는다. 이 기본 골격은 공액환 구조를 갖는 축합환을 나타낸다.



**선행기술문헌**

**특허문헌**

[0009] (특허문헌 0001) 일본 특허 공개 평9-241629호 공보(대응 외국 출원 없음)

**발명의 내용**

**해결하려는 과제**

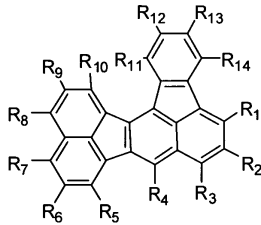
[0010] 벤조[k]플루오란텐은 자외 영역에서만 광을 방출할 수 있고, 청색광은 방출할 수 없다. IK-12는 기본 골격에 치환기가 제공되는 경우 청색광을 방출한다.

[0011] 본 발명은 청색 영역에서 광을 방출할 수 있는 기본 골격을 갖는 신규 유기 화합물을 제공한다.

**과제의 해결 수단**

[0012] 따라서, 본 발명은 하기 화학식 1로 나타내어지는 유기 화합물을 제공한다.

**화학식 1**



[0013]

[0014] 화학식 1에서, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>14</sub>는 각각 독립적으로 수소 원자, 할로겐 원자, 알킬기, 알콕시기, 아미노기, 아릴기 및 복소환기로부터 선택된다.

**발명의 효과**

[0015] 본 발명은 밴드 갭이 넓고 LUMO(최저 비점유 분자 궤도)가 깊은 기본 골격을 갖는 신규 유기 화합물을 제공할 수 있다. 본 발명에 따른 유기 화합물은 청색 영역에서 광을 방출할 수 있는 기본 골격을 갖는다. 기본 골격에 치환기가 도입되는 경우, 청색광 뿐만 아니라 녹색광 및 적색광도 방출할 수 있는 신규 유기 화합물을 제공하는 것도 가능하다. 또한, 이들 신규 유기 화합물 중 어느 하나를 포함하는 유기 발광 소자를 제공할 수 있다.

**도면의 간단한 설명**

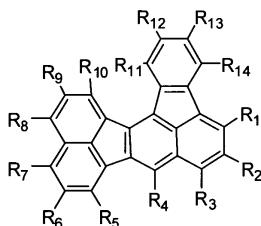
[0016] 도 1은 유기 발광 소자 및 이 유기 발광 소자와 접속되는 TFT(박막 트랜지스터)를 나타내는 단면 모식도이다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0017] 먼저, 본 발명에 따른 유기 화합물을 설명한다.

[0018] 본 발명에 따른 유기 화합물은 하기 화학식 1로 나타내어지는 인데노벤조[k]플루오란텐 유도체이다.

[0019] <화학식 1>



[0020]

[0021] 화학식 1에서, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>14</sub>는 각각 독립적으로 수소 원자, 할로겐 원자, 알킬기, 알콕시기, 아미노기, 아릴기 및 복소환기로부터 선택된다.

[0022] 여기서, 알킬기는 치환기를 가질 수 있다. 알킬기가 가질 수 있는 치환기의 예로는 메틸기, 에틸기, 프로필기 등과 같은 알킬기; 벤질기 등과 같은 아릴알킬기; 페닐기, 비페닐기 등과 같은 아릴기; 피리딜기, 피롤릴기 등과

같은 복소환기; 디메틸아미노기, 디에틸아미노기, 디페닐아미노기, 디톨릴아미노기 등과 같은 아미노기; 메톡실기, 페녹실기 등과 같은 알콕실기; 시아노기; 및 불소, 염소, 브롬, 요오드 등과 같은 할로겐 원자를 들 수 있다. 물론, 치환기는 이들 기에 한정되지 않는다.

[0023] 알콕시기는 치환기를 가질 수 있다. 알콕시기가 가질 수 있는 치환기의 예로는 메틸기, 에틸기, 프로필기 등과 같은 알킬기; 벤질기 등과 같은 아랄킬기; 페닐기, 비페닐기 등과 같은 아릴기; 피리딜기, 피롤릴기 등과 같은 복소환기; 디메틸아미노기, 디에틸아미노기, 디페닐아미노기, 디톨릴아미노기 등과 같은 아미노기; 메톡실기, 페녹실기 등과 같은 알콕실기; 시아노기; 및 불소, 염소, 브롬, 요오드 등과 같은 할로겐 원자를 들 수 있다. 물론, 치환기는 이들 기에 한정되지 않는다.

[0024] 아미노기는 치환기를 가질 수 있다. 아미노기가 가질 수 있는 치환기의 예로는 메틸기, 에틸기, 프로필기 등과 같은 알킬기; 벤질기 등과 같은 아랄킬기; 페닐기, 비페닐기 등과 같은 아릴기; 피리딜기, 피롤릴기 등과 같은 복소환기; 디메틸아미노기, 디에틸아미노기, 디페닐아미노기, 디톨릴아미노기 등과 같은 아미노기; 메톡실기, 페녹실기 등과 같은 알콕실기; 시아노기; 및 불소, 염소, 브롬, 요오드 등과 같은 할로겐 원자를 들 수 있다. 물론, 치환기는 이들 기에 한정되지 않는다.

[0025] 아릴기는 치환기를 가질 수 있다. 아릴기가 가질 수 있는 치환기의 예로는 메틸기, 에틸기, 프로필기 등과 같은 알킬기; 벤질기 등과 같은 아랄킬기; 페닐기, 비페닐기 등과 같은 아릴기; 피리딜기, 피롤릴기 등과 같은 복소환기; 디메틸아미노기, 디에틸아미노기, 디페닐아미노기, 디톨릴아미노기 등과 같은 아미노기; 메톡실기, 페녹실기 등과 같은 알콕실기; 시아노기; 및 불소, 염소, 브롬, 요오드 등과 같은 할로겐 원자를 들 수 있다. 물론, 치환기는 이들 기에 한정되지 않는다.

[0026] 복소환기는 치환기를 가질 수 있다. 복소환기가 가질 수 있는 치환기의 예로는 메틸기, 에틸기, 프로필기 등과 같은 알킬기; 벤질기 등과 같은 아랄킬기; 페닐기, 비페닐기 등과 같은 아릴기; 피리딜기, 피롤릴기 등과 같은 복소환기; 디메틸아미노기, 디에틸아미노기, 디페닐아미노기, 디톨릴아미노기 등과 같은 아미노기; 메톡실기, 페녹실기 등과 같은 알콕실기; 시아노기; 및 불소, 염소, 브롬, 요오드 등과 같은 할로겐 원자를 들 수 있다. 물론, 치환기는 이들 기에 한정되지 않는다.

[0027] 후술하는 화학식 2 및 3에 나타낸 R에 대해서도 동일한 것이 적용된다.

[0028] 본 발명의 발명자들은 기본 골격 자체에 주목하였다. 구체적으로는, 그 분자가 원하는 발광 파장 영역 내에 발광 파장을 갖는 기본 골격을 갖는 유기 화합물을 제공하는 것을 시도하였다.

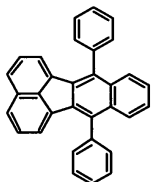
[0029] 원하는 발광 파장을 얻기 위해 기본 골격에 치환기를 제공하는 것이 알려져 있지만, 화합물의 안정성이 손상될 수 있다.

[0030] 본 발명에서, 원하는 발광 파장 영역은 청색 영역이며, 구체적으로는 430nm 이상 480nm 이하이다.

[0031] (인데노벤조[k]플루오란텐 유도체와 다른 유기 화합물 간의 비교)

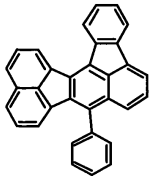
[0032] 벤조[k]플루오란텐을 갖는 유기 화합물과 본 발명에 따른 인데노벤조[k]플루오란텐을 갖는 유기 화합물을 비교한다.

[0033] 비교 대상으로서의 7,12-디페닐벤조[k]플루오란텐은 하기 구조식으로 나타내어진다.



[0034]

[0035] 또한, 본 발명에 따른 유기 화합물로서의 인데노벤조[k]플루오란텐 페닐 치환 생성물은 하기 구조식으로 나타내어진다.



[0036]

[0037]

본 발명에 따른 유기 화합물인, 페닐 치환 인데노벤조[k]플루오란텐을 갖는 유기 화합물의 최대 발광 파장은 443nm이다. 한편, 벤조[k]플루오란텐의 7 및 12위치가 페닐기로 치환된 7,12-디페닐벤조[k]플루오란텐의 최대 발광 파장은 428nm이다. 즉, 본 발명에 따른 유기 화합물에서는, 최대 발광 파장은 430nm 이상 480nm 이하의 범위 내의 청색 발광 영역에 있다. 한편, 비교 대상으로서의 유기 화합물의 최대 발광 파장은 청색 영역으로부터 보다 단파장측으로 벗어나 있다. 또한, 벤조[k]플루오란텐의 계산 최대 발광 파장은 408nm이다. 즉, 기본 골격인 벤조[k]플루오란텐의 최대 발광 파장은 가시 영역이 아니라 자외 영역에 해당한다.

[0038]

이는 본 발명에 따른 인데노벤조[k]플루오란텐 골격이 430nm 이상 480nm 이하의 최대 발광 파장에서 광을 방출하는 것을 나타낸다. 즉, 본 발명에 따른 유기 화합물의 기본 골격은 그 자체가 430nm 이상 480nm 이하의 범위 및 이보다 좁은 범위 내의 청색 영역에서 청색광을 방출할 수 있다.

[0039]

본 발명에 따른 유기 화합물의 기본 골격은 축합환 구조만을 포함하며, 즉 회전 구조를 포함하지 않는다. 따라서, 회전 및/또는 진동으로 인한 양자 수율의 저하를 억제할 수 있다.

[0040]

청색광 영역 내에 최대 발광 파장을 갖는 기본 골격에 대한 조건을 검토하기 위해, 본 발명자들은 5원환이 축합된 벤조[k]플루오란텐을 갖는 다양한 골격의 청색발광의 가능성을 검토하였다.

[0041]

검토에서는, 하기 표 1에 나타난 4종류의 구조식에 주목하였다.

표 1

	구조식	흡수 파장 (nm)	예측 발광 파장 (nm)
a		378	408
b		408	438
c		464	494
d		460	490

[0042]

[0043]

표 1에서 a로 나타난 구조식은 벤조[k]플루오란텐을 나타낸다. 표 1에서 b로 나타난 구조식은 본 발명에 따른 유기 화합물이 갖는 기본 골격인 인데노벤조[k]플루오란텐을 나타낸다. 표 1에서 c 및 d로 나타난 구조식은 각각 5원환이 축합된 벤조[k]플루오란텐 구조를 나타내며, 이는 b로 나타난 인데노벤조[k]플루오란텐과는 상이한 화합물이다.

[0044]

이 4종류의 화합물의 계산 흡수 파장(S1)은 양자 화학 계산에 의해 결정하였다. 이 흡수 파장에 의해 최대 발광 파장의 변화를 예측할 수 있다. 측정된 흡수 파장에 30nm를 더하여 발광 파장의 예측값을 결정하였다. 그 결과를 표 1에 나타낸다. 예측 발광 파장과 흡수 파장의 차인 30nm는 경험으로부터 결정되었다.

[0045]

예측 발광 파장을 기초로 이들 구조식의 최대 발광 파장을 비교할 수 있다. 이는, 비교 대상으로서의 7,12-디페닐벤조[k]플루오란텐의 예측 발광 파장은 420nm이고, 상술한 바와 같이, 측정값은 428nm이므로, 발광 예측값과 측정값은 실질적으로 동일한 것으로 간주할 수 있기 때문이다.

- [0046] 이 표에 나타낸 흡수 파장은 밀도 함수 이론을 이용하여 B3LYP/6-31G\* 레벨에서 양자 화학 계산에 의해 결정하였다.
- [0047] 이 표에 나타낸 4종류의 화합물은 상이한 예측 발광 파장을 나타낸다. 첫번째의 벤조[k]플루오란텐의 예측 발광 파장은 408nm이며, 즉 청색 발광 영역의 밖이다.
- [0048] 표 1에 나타낸 화합물 c 및 화합물 d의 예측 발광 파장도 430nm 이상 480nm 이하의 청색 발광 영역의 밖에 있다.
- [0049] 이는 골격이 2개의 5원환 구조를 갖든지, 또는 벤조[k]플루오란텐 구조에 5원환이 축합되어 있든지, 5원환이 벤조[k]플루오란텐구조의 특정 위치에 제공되지 않으면 청색 발광 영역의 광을 방출할 수 없음을 나타낸다. 즉, 이들 화합물 중에서, 기본 골격으로서 본 발명에 따른 인데노벤조[k]플루오란텐을 갖는 유기 화합물만이 기본 골격 단독으로 청색 발광 영역의 광을 방출한다.
- [0050] 또한, 본 발명에 따른 유기 화합물은 기본 골격 단독으로 청색 발광 영역의 광을 방출할 뿐만 아니라, 기본 골격에 제공되는 2개의 5원환 구조 때문에 HOMO(최고 점유 분자 궤도) 에너지 레벨이 낮다. 즉, 산화 전위가 낮다. 다시 말하면, 본 발명에 따른 유기 화합물은 산화에 대해 안정하다.
- [0051] 또한, 본 발명에 따른 유기 화합물은 기본 골격에 질소 원자 등과 같은 헤테로 원자를 갖지 않는다. 이는 또한 낮은 산화 전위에 기여하며, 즉 유기 화합물의 산화 안정성에 기여한다.
- [0052] 본 발명에 따른 유기 화합물의 기본 골격은 HOMO 에너지 레벨이 낮다. 즉, LUMO 에너지 레벨도 낮다.
- [0053] 특허문헌 1에서 IK-12로 나타내어지는 유기 화합물은 청색 발광을 수행하기 위해 전자 공여성 t-부틸기를 갖는다. 따라서, 유기 화합물의 HOMO 및 LUMO는 벤조[k]플루오란텐의 그것보다 낮아진다. 즉, IK-12로 나타내어지는 유기 화합물은 에너지 레벨이 높고, 따라서 분자가 산화되기 쉬워진다. 즉, 본 발명에 따른 유기 화합물은 IK-12로 나타내어지는 유기 화합물보다 산화에 더 안정하다.
- [0054] 본 발명에 따른 유기 화합물은 발광층의 게스트 재료 또는 호스트 재료로서 사용된다. 또한, 본 발명에 따른 유기 화합물은 발광층 이외의 임의의 층, 즉 정공 주입층, 정공 수송층, 정공/여기자 블로킹층, 전자 수송층 및 전자 주입층에 사용될 수 있다.
- [0055] 본 발명에 따른 유기 화합물은 유기 발광 소자의 발광층의 게스트 재료로서 사용될 수 있다. 특히, 본 발명에 따른 유기 화합물은 청색 발광 소자의 게스트 재료로서 사용될 수 있다.
- [0056] 본 발명에 따른 유기 화합물은, 기본 골격에 발광 파장을 보다 장파장측으로 시프트시킬 수 있는 치환기를 제공함으로써 녹색 발광성 재료 및 적색 발광성 재료로서 사용할 수 있다. 발광 파장이 보다 장파장인 재료는 본 발명에 따른 유기 화합물과 동일한 기본 골격을 가지며, 따라서 산화에 대해 안정하다.
- [0057] 발광 파장을 보다 장파장측으로 시프트시킬 수 있는 치환기의 예로는 트리아릴아민, 안트라센 등을 들 수 있다.
- [0058] 본 발명에 따른 유기 화합물은 발광층의 게스트 재료로서 사용할 수 있으며, 이 유기 화합물보다 LUMO가 높은 재료, 즉 진공 레벨에 근접하는 에너지 레벨을 갖는 재료를 호스트 재료로서 사용할 수 있다. 이는, 본 발명에 따른 유기 화합물은 LUMO가 낮고, 따라서 호스트 재료로부터, 이 호스트 재료, 즉 발광층에 공급되는 전자를 충분히 수용할 수 있기 때문이다.
- [0059] 본 발명에 따른 유기 화합물은 밴드 갭이 넓은 기본 골격을 가지며, 따라서 녹색 및 적색 발광층의 호스트 재료로서 사용될 수 있다.
- [0060] 호스트 재료 및 게스트 재료와 관련하여, 호스트 재료는 발광층을 구성하는 화합물 중에서 중량비가 가장 높은 화합물이며, 게스트 재료는 발광층을 구성하는 화합물 중에서 호스트 재료보다 중량비가 낮은 화합물이다.
- [0061] 호스트 재료 및 게스트 재료에 대해서는 추가로 후술한다. 본 발명에 따른 유기 화합물은 유기 발광 소자의 발광층의 게스트 재료로서 사용할 수 있다. 그 결과, 본 발명에 따른 유기 화합물로부터의 발광으로 인해 청색광을 방출하는 유기 발광 소자를 제공하는 것이 가능하다.
- [0062] (본 발명에 따른 유기 화합물의 예시)

[0063] 화학식 1로 나타내어지는 화합물의 예를 하기에 기재한다. 그러나, 본 발명은 이들에 한정되지 않는다.



A1



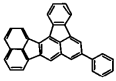
A2



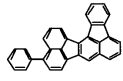
A3



A4



A5



A6



A7



A8



A10



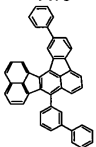
A11



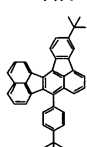
A12



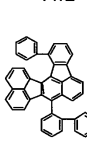
A13



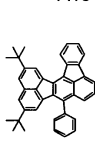
A14



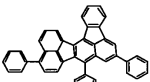
A15



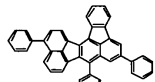
A16



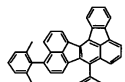
A17



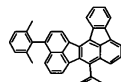
A18



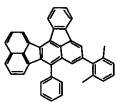
A19



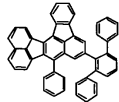
A20



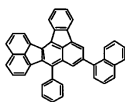
A21



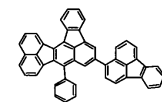
A22



A23



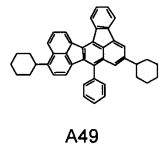
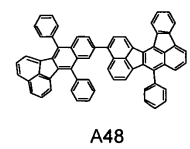
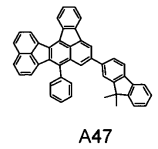
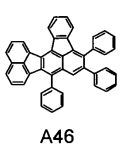
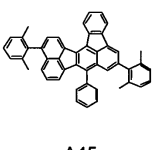
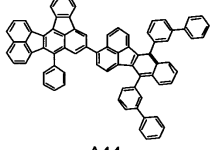
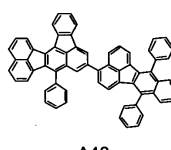
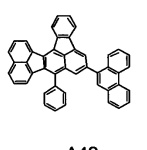
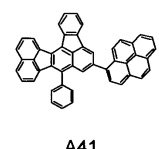
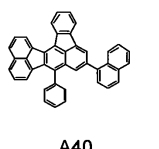
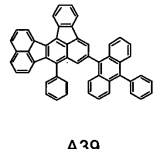
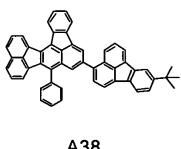
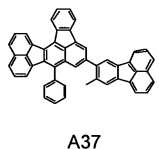
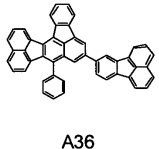
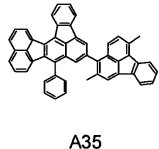
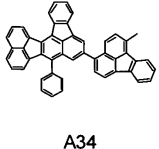
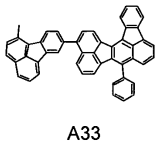
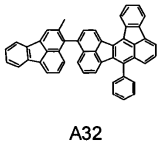
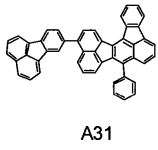
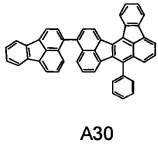
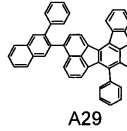
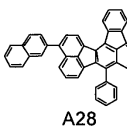
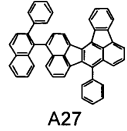
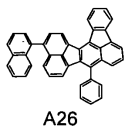
A24



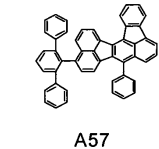
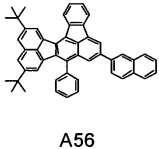
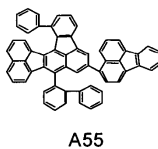
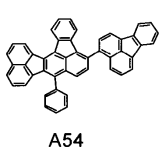
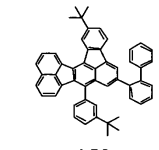
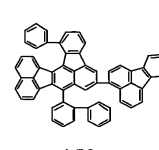
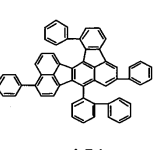
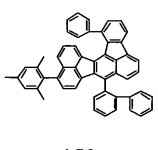
A25

[0064]

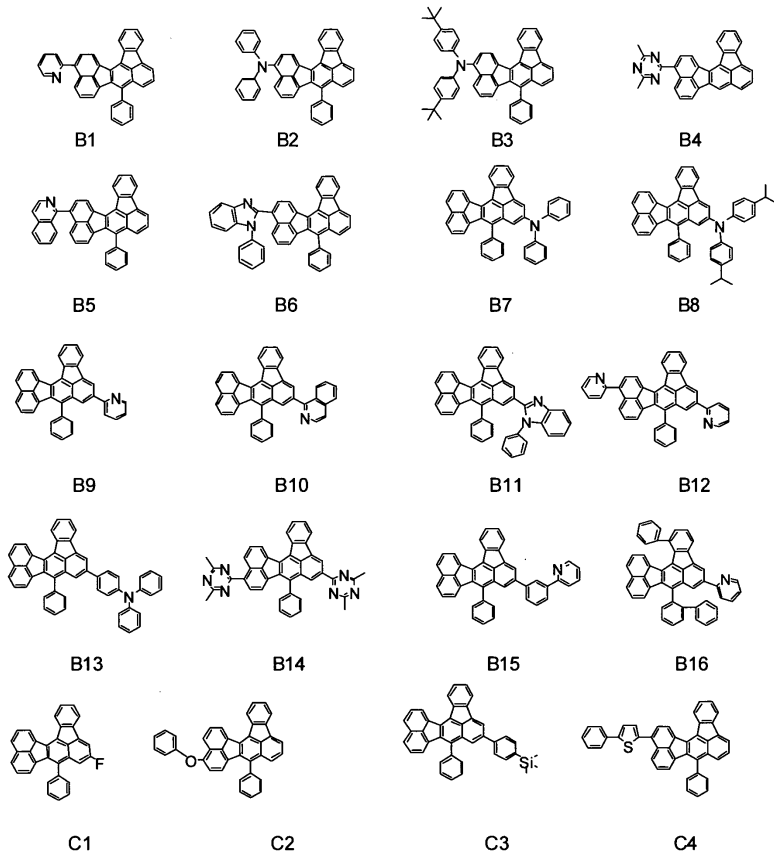




[0065]



[0066]



[0067]

[0068] (각 예시 화합물 군의 성질)

[0069] 예시 화합물 중에서, 군 A로 나타낸 화합물은 각각 전체가 탄화수소만으로 구성되는 분자를 갖는다. 탄화수소만으로 구성되는 화합물은 HOMO 에너지 레벨이 낮다. 따라서, 산화 전위가 감소되고, 이는 이 유기 화합물이 산화에 대해 안정함을 나타낸다.

[0070] 따라서, 본 발명에 따른 유기 화합물 중에서, 탄화수소만으로 구성되며 군 A로 나타낸 화합물은 분자 안정성이 높다.

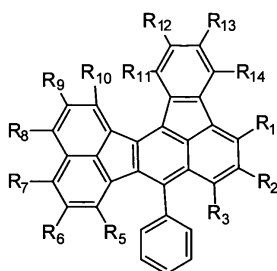
[0071] (예시 화합물 A1 내지 A57의 성질)

[0072] 다음으로, 화합물 A1 내지 A57 중에서 보다 바람직한 예시 화합물을 설명한다.

[0073] 기본 골격과 직교하도록 치환기를 기본 골격에 도입하는 경우, 이는 삼차원 구조를 가지며, 따라서 분자간의 중첩을 억제할 수 있어, 농도 소광을 억제할 수 있다.

[0074] 이는 A1 내지 A57로 나타낸 예시 화합물 중에서, A8 내지 A57로 나타낸 화합물에 해당한다. 이들 화합물은 화학식 2로 나타내어질 수 있다. 화학식 2로 나타내어지는 화합물은 화학식 1의 R<sub>4</sub> 위치에 페닐기를 도입함으로써 분자의 스테킹을 억제할 수 있다. 따라서, 이 화합물은 농도 증가로 인한 소광을 억제하는 효과를 갖는다.

**화학식 2**



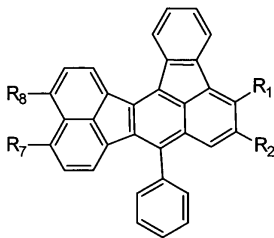
[0075]

[0076] 화학식 2에서, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub> 및 R<sub>5</sub> 내지 R<sub>14</sub>는 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기 및 아릴기로부터 선택된다.

[0077] (예시 화합물 A8 내지 A57의 성질)

[0078] A8 내지 A57로 나타낸 화합물 중에서, A18 내지 A48 및 A50 내지 A57로 나타낸 화합물은 기본 골격의 공액면에서 공액 길이가 긴 방향으로 방향족 치환기를 가지며, 따라서 분자 진동자 강도가 높고, 양자 수율이 높다. 이들 화합물은 하기 화학식 3으로 나타내어질 수 있다. 화학식 3에 나타낸 바와 같이, R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>7</sub> 및 R<sub>8</sub> 이외의 치환기를 도입하지 않음으로써 양자 수율이 높은 화합물을 얻을 수 있다.

**화학식 3**



[0079]

[0080] 화학식 3에서, R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>7</sub> 및 R<sub>8</sub>은 각각 독립적으로 수소 원자, 알킬기 및 아릴기로부터 선택된다. 또한, 이들 치환기 중 적어도 하나는 아릴기이다.

[0081] (예시 화합물 B1 내지 B16의 성질)

[0082] 또한, 치환기가 B1 내지 B16으로 나타낸 바와 같은 질소 함유 구조인 경우, 질소 원자로 인해 분자의 산화 전위가 변화될 수 있다. 치환기가 질소 함유 구조인 경우, 최대 발광 파장이 보다 장파장측으로 시프트될 수 있다. 치환기가 질소 함유 구조인 경우, 전자 수송, 정공 수송, 정공 트랩 발광성 재료와 같은 용도에서의 사용을 실현할 수 있다.

[0083] (예시 화합물 C1 내지 C4의 성질)

[0084] 또한, 치환기가 C1 내지 C4로 나타낸 바와 같은 질소 이외의 헤테로 원자를 함유하는 경우, 분자의 산화 전위가 더욱 변화되거나, 분자간 상호작용이 변화된다. 치환기가 질소 이외의 헤테로 원자를 함유하는 경우, 최대 발광 파장이 보다 장파장측으로 시프트될 수 있다. 치환기가 질소 이외의 헤테로 원자를 함유하는 경우, 전자 수송, 정공 수송 및 정공 트랩 발광성 재료와 같은 용도에서의 사용은 100%의 고농도를 실현할 수 있다.

[0085] 상기와 같이 예시 화합물을 군 A 내지 C로서 기재하였다. 이들 화합물은 청색광을 방출하는 기본 골격을 갖는다. 또한, 본 발명에 따른 유기 화합물의 기본골격은 치환기를 제공함으로써 청색광보다 장파장의 광, 구체적으로는 녹색광을 방출할 수 있다. 화학식 1로 나타내어지는 유기 화합물은 예시 화합물에 한정되지 않으며, 유기 발광 소자의 호스트 재료, 전자 수송층, 전자 주입층, 정공 수송층, 정공 주입층, 정공 블로킹층 등에 사용할 수 있다. 이 경우, 유기 발광 소자의 발광색은 청색에 한정되지 않으며, 보다 구체적으로는 녹색, 적색, 백색 또는 중간색일 수 있다. 또한, 이 화합물은 녹색광을 방출하는 유기 발광 소자의 발광층의 호스트 재료로서 사용할 수 있다.

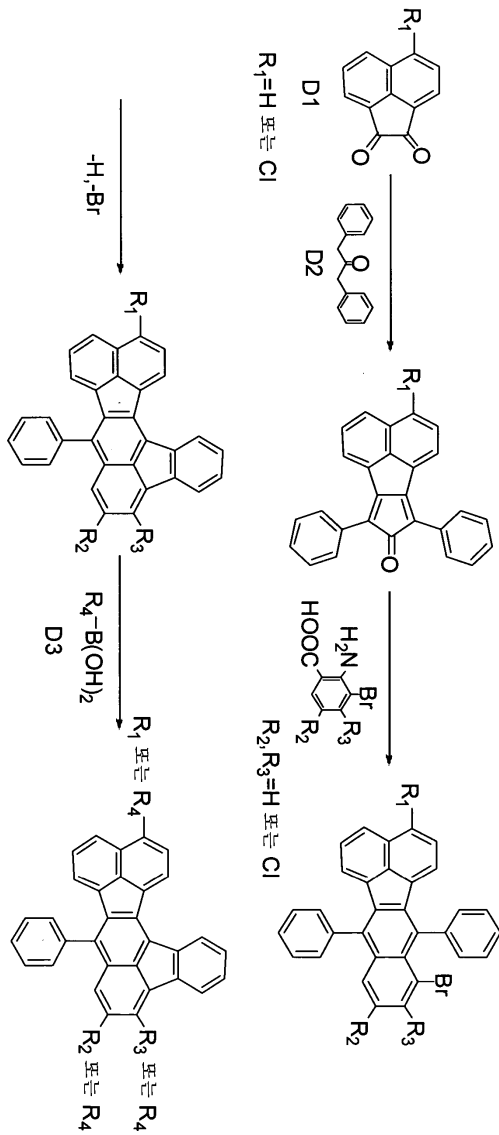
[0086] (합성 경로의 설명)

[0087] 본 발명에 따른 유기 화합물의 합성 경로의 일례를 설명한다. 반응식을 하기에 기재한다. 대표적인 치환기로서 R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub> 또는 R<sub>3</sub>이 수소 또는 할로젠인 예를 설명한다. 합성 경로 중의 제3 단계에서 탈브롬화 반응은 팔라듐 촉매의 존재 하에 가열함으로써 행한다.

[0088] R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub> 또는 R<sub>3</sub>이 할로젠인 경우, 이 할로젠 위치에서, 기본 골격으로서의 인데노벤조[k]플루오란텐을 D3으로 나타낸 아릴보론산과 커플링시킨다. 이에 의해 다양한 치환기를 도입할 수 있다. 이 경우, R<sub>4</sub>는 아릴기를 나타낸다. 하기 반응식에는 나타나 있지 않지만, 아릴아민도 동일한 방법에 의해 치환기로서 도입할 수 있다. 하기

반응식에서 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>로 나타낸 위치 이외의 위치에 치환기를 도입하는 경우에는, 도입 위치의 수소 원자를 또다른 치환기로 치환함으로써 합성을 행할 수 있다. 치환기의 예로는 알킬기, 할로겐 원자, 페닐기 등을 들 수 있다.

[0089] (합성 경로)

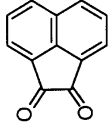
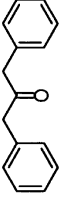
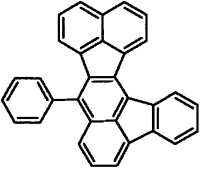
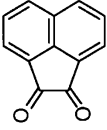
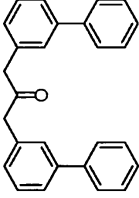
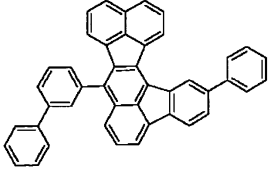


[0090]

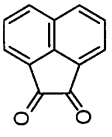
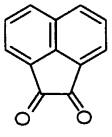
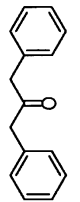
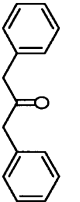
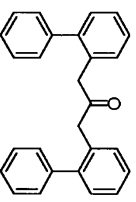
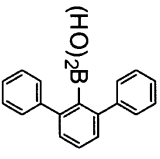
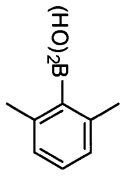
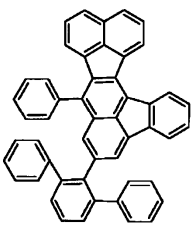
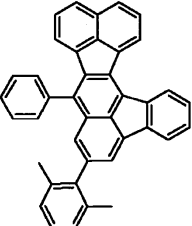
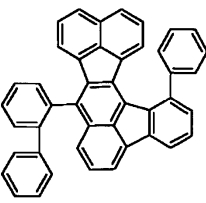
[0091] (기타 유기 화합물 및 원료)

[0092] 상기 반응식에서 D1 내지 D3을 각각 변경함으로써 다양한 유기 화합물을 합성할 수 있다. 전형적인 예를 표 2 및 3에 합성 화합물로서 나타낸다. 하기 표에는 합성 화합물을 제조하기 위한 원료로서의 D1 내지 D3도 나타낸다.

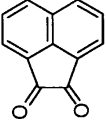
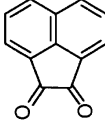
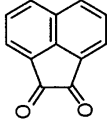
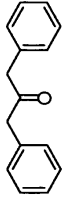
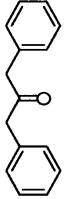
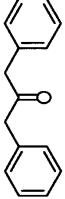
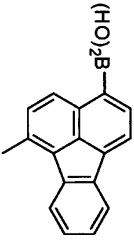
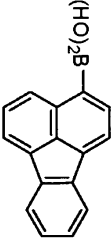
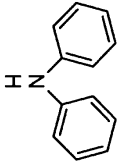
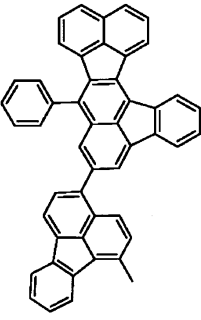
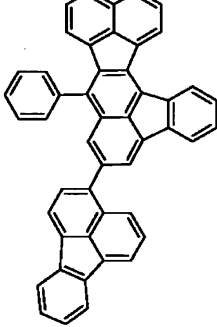
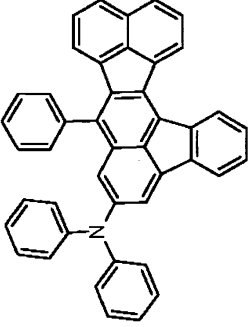
표 2

합성예	D1	D2	D3	합성 화합물	예시 화합물 번호
1			.		A8
2			.		A16

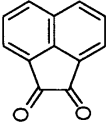
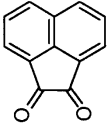
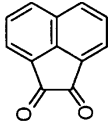
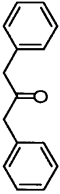
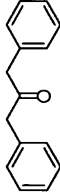
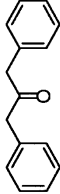
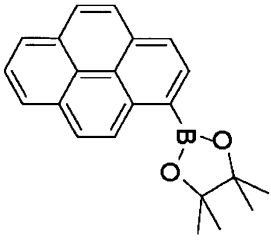
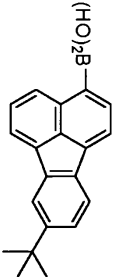
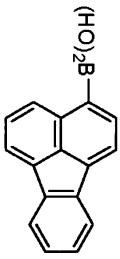
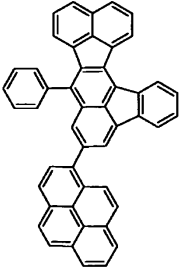
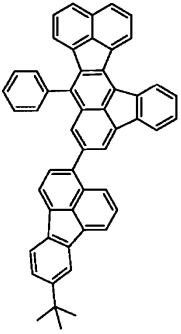
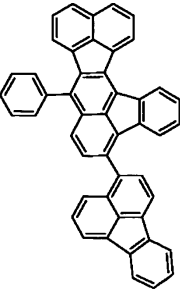
[0093]

5		
		
		<p>.</p>
		
A23	A22	A16

[0094]

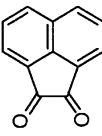
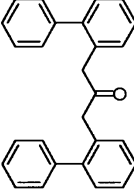
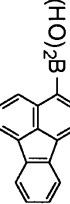
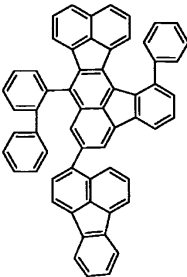
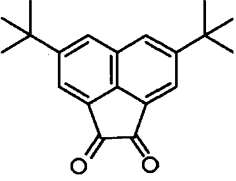
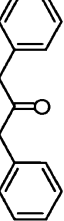
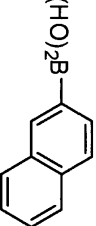
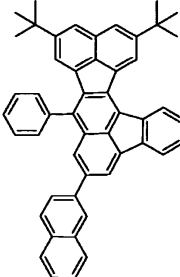
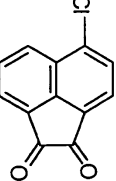
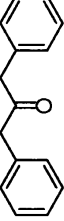
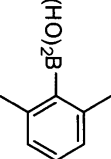
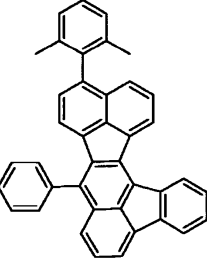
8	7	6
		
		
		
		
A34	A25	D7

[0095]

11	10	9
		
		
		
		
A41	A38	A54

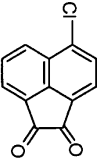
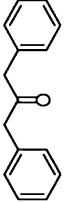
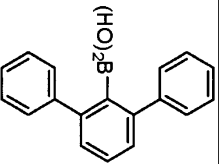
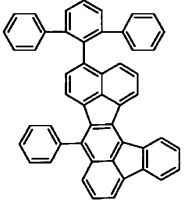
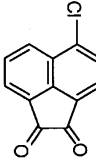
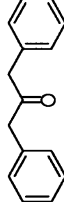
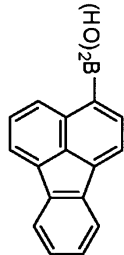
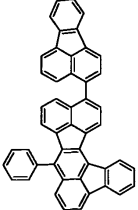
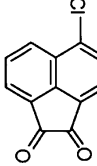
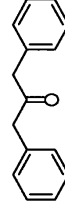
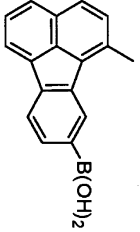
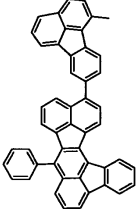
[0096]



12					A55
13					A56
14					A20

[0097]

표 3

합성계	D1	D2	D3	합성 화합물	예시 화합물 번호
15					A57
16					A30
17					A33

22	21	20	19	18
A45	A18	A50	B1	B3

[0099]

[0100] (유기 발광 소자의 설명)

[0101] 다음으로, 본 발명에 따른 유기 발광 소자를 설명한다.

[0102] 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 한 쌍의 전극, 즉 애노드 및 캐소드, 및 이 전극 사이에 배치되는 유기 화합물층을 적어도 포함한다. 유기 화합물층은 화학식 1로 나타내어지는 유기 화합물을 함유한다. 유기 발광 소자는, 애노드 및 캐소드로부터 캐리어가 주입되어 유기 화합물층 중의 발광성 유기 화합물의 여기자를 생성시켜, 이 여기자가 기저 상태로 복귀될 때 광을 방출하는 소자이다.

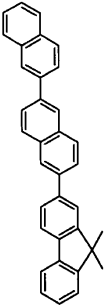
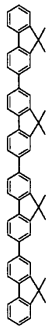
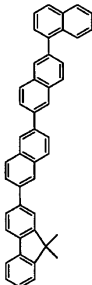
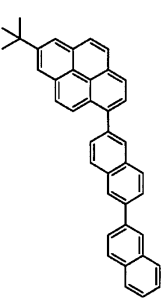
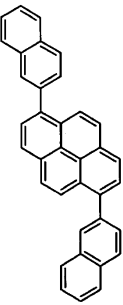
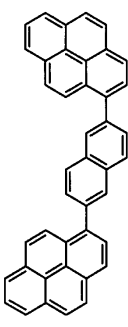
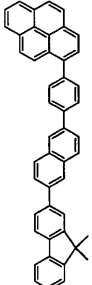
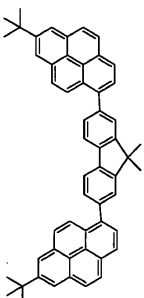
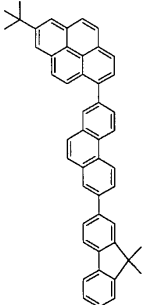
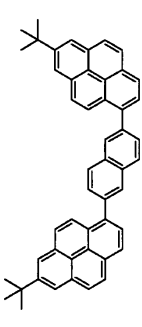
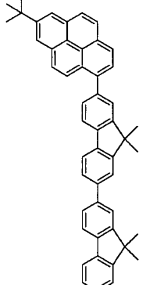
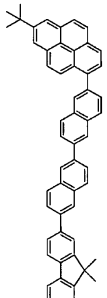
[0103] 유기 화합물층이 발광층으로서 기능하는 경우, 발광층은 본 발명에 따른 유기 화합물만을 포함할 수 있거나, 또는 또다른 성분이 발광층에 존재할 수 있다.

[0104] 발광층이 본 발명에 따른 유기 화합물을 부분적으로 함유할 수 있는 경우, 본 발명에 따른 유기 화합물은 발광

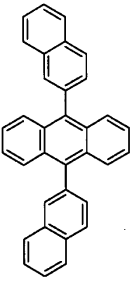
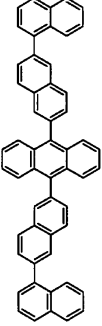
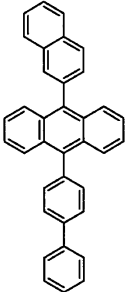
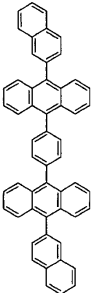
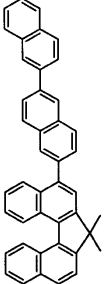
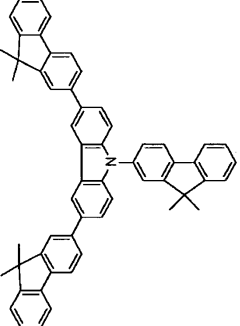
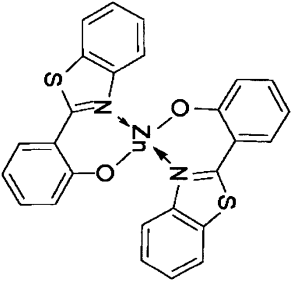
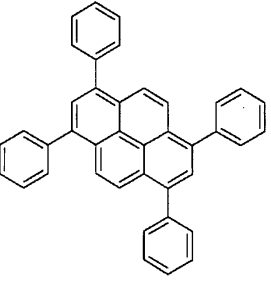
층의 주성분 또는 부성분 중 하나일 수 있다.

- [0105] 주성분 및 부성분과 관련하여, 발광층을 구성하는 화합물 중에서 중량비가 가장 높은 성분을 "주성분"이라 칭하고, 주성분보다 중량비가 낮은 성분을 "부성분"이라 칭한다.
- [0106] 주성분용 재료는 "호스트 재료"로 칭할 수 있다.
- [0107] 부성분용 재료는 도펀트(게스트) 재료이다. 부성분으로서 사용될 수 있는 다른 재료로서는 발광성 어시스트 재료 및 전하 주입 재료를 들 수 있다.
- [0108] 본 발명에 따른 화합물을 게스트 재료로서 사용하는 경우, 게스트 재료의 농도는 호스트 재료에 대해 바람직하게는 0.01중량% 이상 20중량% 이하, 보다 바람직하게는 0.5중량% 이상 10중량% 이하이다.
- [0109] 다양한 검토의 결과, 본 발명자들은, 본 발명의 화학식 1로 나타내어지는 유기 화합물을 발광층의 호스트 재료 또는 게스트 재료, 특히 게스트 재료로서 사용한 소자는 고효율 및 고휘도의 광출력과 높은 내구성을 갖는다는 것을 발견하였다.
- [0110] 본 발명에 따른 유기 화합물을 사용한 유기 발광 소자의 예를 하기에 설명한다.
- [0111] 본 발명에 따른 유기 화합물을 사용하여 제작되는 유기 발광 소자로서는, 기판 상에, 순차적으로 애노드, 발광층 및 캐소드를 설치하여 구성된 소자를 들 수 있다. 또한, 유기 발광 소자로서는 순차적으로 애노드, 정공 수송층, 전자 수송층 및 캐소드를 설치하여 구성된 소자를 들 수 있다. 또한, 유기 발광 소자로서는 순차적으로 애노드, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층 및 캐소드를 설치하여 구성된 소자, 순차적으로 애노드, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층 및 캐소드를 설치하여 구성된 소자, 및 순차적으로 애노드, 정공 수송층, 발광층, 정공/여기자 블로킹층, 전자 수송층 및 캐소드를 설치하여 구성된 소자를 들 수 있다. 그러나, 이들 다층형의 5가지 예는 단지 기본적인 소자 구성이며, 본 발명에 따른 화합물을 사용한 유기 발광 소자의 구성은 이들에 한정되지 않는다. 예를 들어, 전극과 유기 화합물층 사이의 계면에 절연층을 설치하거나, 직접층 또는 간접층을 설치하거나, 전자 수송층 또는 정공 수송층이 이온화 포텐셜이 상이한 2층을 포함하는 등의 다양한 층 구성이 이루어질 수 있다.
- [0112] 본 발명에 따른 화학식 1로 나타내어지는 유기 화합물은, 이 층 구성 중 어느 하나를 갖는 발광 소자의 유기 화합물층에 사용될 수 있다.
- [0113] 본 발명의 유기 화합물은 필요에 따라 공지의 저분자 또는 고분자 정공 주입 화합물 또는 수송 화합물, 호스트 재료로서의 호스트 화합물, 발광성 화합물, 전자 주입 화합물 또는 전자 수송 화합물 등과 함께 사용할 수 있다.
- [0114] 이들 화합물의 예를 하기에 기재한다.
- [0115] 정공 주입 화합물 또는 정공 수송 화합물로서는, 정공 이동도가 높은 재료를 사용할 수 있다. 정공 주입 성능 또는 정공 수송 성능을 갖는 저분자 또는 고분자 재료로서는 트리아릴아민 유도체, 페닐렌디아민 유도체, 스틸벤 유도체, 프탈로시아닌 유도체, 포르피린 유도체, 폴리(비닐카르바졸), 폴리(티오펜) 및 기타 도전성 중합체를 들 수 있다. 물론, 이러한 재료는 이들에 한정되지 않는다.
- [0116] 호스트 화합물의 구체적인 구조식을 표 4에 나타낸다. 호스트 화합물은 표 4에 나타낸 임의의 구조식을 갖는 유도체일 수 있다. 다른 호스트 화합물로서는 축합환 화합물(예를 들어, 플루오렌 유도체, 나프탈렌 유도체, 안트라센 유도체, 피렌 유도체, 카르바졸 유도체, 퀴녹살린 유도체, 퀴놀린 유도체 등), 트리스(8-퀴놀리놀레이토)알루미늄 등과 같은 유기 알루미늄 착체, 유기 아연 착체, 트리페닐아민 유도체, 및 폴리(플루오렌) 유도체, 폴리(페닐렌) 유도체 등과 같은 중합체 유도체를 들 수 있다. 물론, 호스트 화합물은 이들 화합물에 한정되지 않는다.

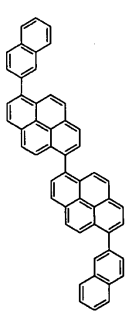
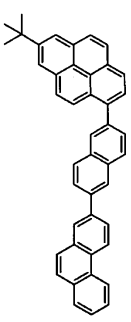
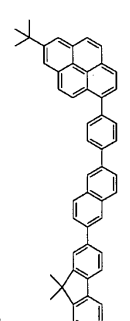
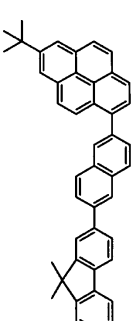
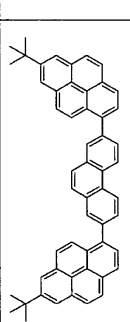
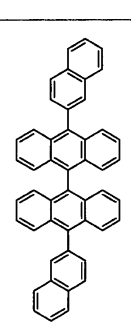
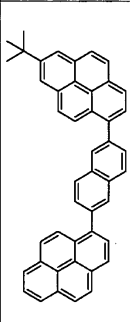
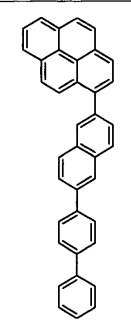
표 4

<p>H1</p> 	<p>H2</p> 	<p>H3</p> 	<p>H4</p> 
<p>H5</p> 	<p>H6</p> 	<p>H7</p> 	<p>H8</p> 
<p>H9</p> 	<p>H10</p> 	<p>H11</p> 	<p>H12</p> 

[0117]

<p>H13</p> 	<p>H14</p> 	<p>H15</p> 	<p>H16</p> 
<p>H17</p> 	<p>H18</p> 	<p>H19</p> 	<p>H20</p> 

[0118]

	H25		H21
	H26		H22
	H27		H23
	H28		H24

[0119]

[0120]

전자 주입 화합물 또는 전자 수송 화합물은 정공 주입 화합물 또는 정공 수송 화합물의 정공 이동도와의 밸런스 등을 고려하여 선택된다. 전자 주입 성능 또는 전자 수송 성능을 갖는 화합물로서는 옥사디아졸 유도체, 옥사졸 유도체, 피라진 유도체, 트리아졸 유도체, 트리아진 유도체, 퀴놀린 유도체, 퀴녹살린 유도체, 페난트롤린 유도체, 유기 알루미늄 착체 등을 들 수 있다. 물론, 이러한 화합물은 이들에 한정되지 않는다.

[0121]

애노드 재료로서는, 가능한 한 일함수가 큰 재료를 사용할 수 있다. 이러한 재료의 예로는, 금, 백금, 은, 구리, 니켈, 팔라듐, 코발트, 셀레늄, 바나듐, 텅스텐 등과 같은 원소 금속; 이들 금속의 합금; 및 산화주석, 산화아연, 산화주석인듐(ITO), 산화아연인듐 등과 같은 금속 산화물을 들 수 있다. 또한, 폴리아닐린, 폴리피롤, 폴리티오펜 등과 같은 도전성 중합체를 사용할 수 있다. 이들 전극 재료는 단독으로 또는 2종 이상의 조합으로 사용할 수 있다. 애노드는 단일층 또는 다중층을 포함할 수 있다.

[0122]

한편, 캐소드 재료로서는, 일함수가 작은 재료를 사용할 수 있다. 이러한 재료의 예로는, 리튬 등과 같은 알칼리 금속, 칼슘 등과 같은 알칼리 토금속, 및 알루미늄, 티타늄, 망간, 은, 납, 크롬 등과 같은 원소 금속을 들 수 있다. 이들 원소 금속의 조합을 포함하는 합금도 사용할 수 있다. 예를 들어, 마그네슘-은,

알루미늄-리튬, 알루미늄-마그네슘 등을 사용할 수 있다. 또한, 산화주석인듐(ITO) 등과 같은 금속 산화물도 사용할 수 있다. 이들 전극 재료는 단독으로 또는 2종 이상의 조합으로 사용할 수 있다. 캐소드는 단일층 또는 다중층을 포함할 수 있다.

[0123] 본 발명에 따른 유기 발광 소자에서, 본 발명에 따른 유기 화합물을 함유하는 층 및 다른 유기 화합물을 함유하는 층은 하기에 기재된 방법에 의해 형성된다. 일반적으로, 진공 증착법, 이온화 증착법, 스퍼터링, 플라즈마, 또는 적당한 용매 용액을 사용하여 공지의 도포법(예를 들어, 스핀 코팅, 디핑, 캐스팅, LB법, 잉크젯법 등)에 의해 박막을 형성한다. 진공 증착법, 용액 도포법 등에 의해 층을 형성하는 경우, 결정화가 거의 일어나지 않고, 우수한 경시 안정성이 발휘된다. 도포법에 의해 막을 형성하는 경우, 적당한 바인더 수지를 유기 화합물과 조합하여 막을 형성할 수 있다.

[0124] 바인더 수지의 예로는, 폴리비닐 카르바졸 수지, 폴리카르보네이트 수지, 폴리에스테르 수지, ABS 수지, 아크릴 수지, 폴리이미드 수지, 페놀 수지, 에폭시 수지, 실리콘 수지, 요소 수지 등을 들 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다. 이들 바인더 수지는 단독중합체 또는 공중합체로서 단독으로, 또는 혼합물 또는 2종 이상으로서 사용할 수 있다. 또한, 필요에 따라 가소제, 산화 방지제, 자외선 흡수제 등과 같은 공지의 첨가제를 첨가할 수 있다.

[0125] (유기 발광 소자의 용도)

[0126] 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 표시 장치 및 조명 장치에 사용할 수 있다. 다른 용도로서는 전자 사진 화상 형성 장치의 노광 광원, 액정 표시 장치의 백라이트 등을 들 수 있다.

[0127] 표시 장치는 표시부에 설치된 본 발명에 따른 유기 발광 소자를 포함한다. 표시부는 본 발명에 따른 유기 발광 소자를 갖는 화소를 포함한다. 표시 장치는 PC 등의 화상 표시 장치로서 사용할 수 있다.

[0128] 표시 장치는 디지털 카메라, 디지털 비디오 카메라 등과 같은 촬상 장치의 표시부에 사용될 수 있다. 촬상 장치는 표시부 및 촬상하기 위한 촬상 광학계를 갖는 촬상부를 포함한다.

[0129] 다음으로, 본 발명에 따른 유기 발광 소자를 사용한 표시 장치를 설명한다.

[0130] 도 1은 본 발명에 따른 유기 발광 소자 및 이 유기 발광 소자를 구동하기 위해 유기 발광 소자와 접속되는 TFT를 나타내는 단면 모식도이다. 상세한 구조를 하기에 설명한다.

[0131] 도 1에 나타난 표시 장치(3)는 유리 등의 기판(31), 및 TFT 또는 유기 화합물층을 보호하기 위해 이 기판(31) 상에 설치되는 방습막(32)을 포함한다. 참조 부호 33은 Cr 등과 같은 금속으로 이루어지는 게이트 전극(33)을 나타낸다. 참조 부호 34는 게이트 절연막을 나타내고, 참조 부호 35는 반도체층을 나타낸다.

[0132] TFT 소자(38)는 반도체층(35), 드레인 전극(36) 및 소스 전극(37)을 포함한다. 또한, TFT 소자(38) 상에는 절연막(39)이 설치된다. 유기 발광 소자의 애노드(311)는 컨택트홀(쓰루홀)(310)을 통해 소스 전극(37)과 접속되어 있다.

[0133] 이 도면에서, 다층 유기 화합물층(312)은 단일층으로서 나타내어진다. 또한, 캐소드(313) 상에는 유기 발광 소자의 열화를 억제하기 위해 제1 보호층(314) 및 제2 보호층(315)이 설치된다.

[0134] 유기 발광 소자의 발광 휘도는 TFT 소자에 의해 제어된다. 복수의 유기 발광 소자를 면내에 설치하여, 각각의 유기 발광 소자의 발광 휘도에 의해 화상을 표시할 수 있다.

[0135] 본 발명의 유기 발광 소자를 사용한 표시 장치를 구동함으로써, 화질이 양호하며 장기 안정성을 갖는 표시가 이루어질 수 있다.

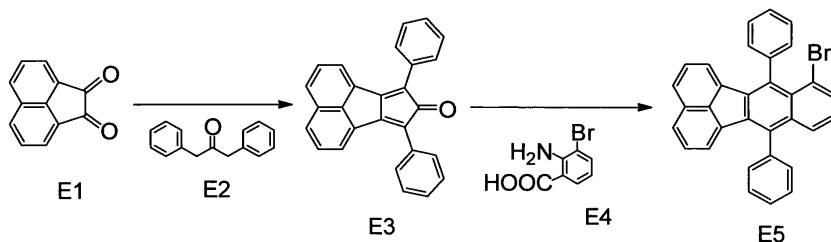
[0136] 실시예

[0137] 이하, 실시예를 설명한다. 본 발명은 이들 실시예에 한정되지 않는다.

[0138] 실시예 1

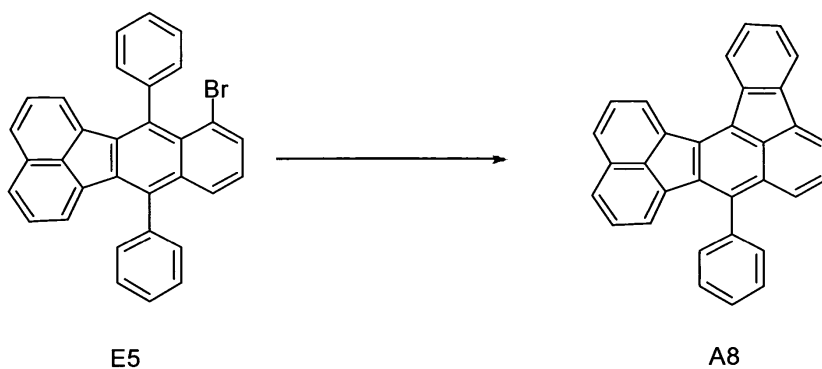


[0139] [예시 화합물 A8의 합성]



[0140]

[0141] 먼저, E1 9.1g(50mmol) 및 E2 10.5g(50mmol)을 에탄올 200ml에 넣고, 60℃로 가열한 후, 5M 수산화나트륨 수용액 20ml을 적가하였다. 적가 후, 생성된 혼합물을 80℃로 가열하고, 2시간 동안 교반한 후, 냉각시켰다. 그 후, 생성된 침전물을 여과하고, 물 및 에탄올로 세척한 후, 80℃에서 감압 하에 가열함으로써 건조시켜 암녹색 고체 E3 15.6g(수율: 88%)을 제조하였다. 다음으로, E3 3.56g(10mmol) 및 E4 2.59g(12mmol)을 톨루엔 50ml에 넣고, 80℃로 가열한 후, 이소아밀 니트라이트 1.40g(12mmol)을 천천히 적가한 후, 110℃에서 3시간 동안 교반하였다. 냉각 후, 혼합물을 각 회마다 물 100ml로 2회 세척하였다. 생성된 유기층을 포화 염수로 세척하고, 황산마그네슘으로 건조시켰다. 그 후, 용액을 여과하고, 여액을 농축하여 다갈색 액체를 얻었다. 이 액체를 컬럼 크로마토그래피(톨루엔/헵탄=2:3)에 의해 정제한 후, 클로로포름/메탄올로 재결정하여 이성질체 혼합물 3.96g(수율: 88%)을 황색 결정 E5로서 얻었다.



[0142]

[0143] 그 후, E5 2.42g(5mmol)을 DMF 40ml에 넣고, 비스(트리페닐포스핀)팔라듐(II) 디클로라이드 0.25g(0.5mmol) 및 1,8-디아자비시클로[5.4.0]운데카-7-엔 2.28g(15mmol)을 생성된 혼합물에 첨가한 후, 150℃로 가열하고, 4시간 동안 교반하였다. 냉각 후, 메탄올 30ml을 혼합물에 첨가하여 침전물을 석출시킨 후, 여과하여 황색 고체를 얻었다. 생성된 고체를 컬럼 크로마토그래피(클로로포름/헵탄=1:4)에 의해 정제한 후, 클로로포름/메탄올로 2회 재결정하여 예시 화합물 A8 1.35g(수율: 67%)을 황색 결정으로서 얻었다.

[0144] 또한, NMR 측정에 의해 화합물 A8의 구조를 확인하였다.

$^1\text{H NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ , 500 MHz)  $\sigma$  (ppm): 8.75 (d, 1H, J = 7.00 Hz), 8.66 (d, 1H, J = 7.55 Hz), 8.05 (d, 1H, J = 7.05 Hz), 7.99-7.93 (m, 2H), 7.85-7.79 (m, 2H), 7.66-7.48 (m, 9H), 7.37 (t, 1H, J = 7.2 Hz), 6.75 (d, 1H, J = 6.95 Hz).

[0145]

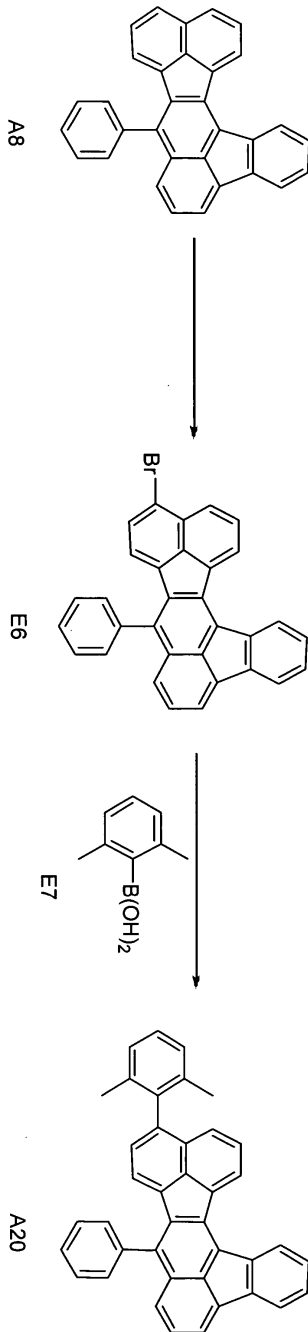
[0146] 히타치(Hitachi) F-4500을 사용하여 350nm의 여기 파장에서 예시 화합물 A8의  $1 \times 10^{-5}$  mol/L 톨루엔 용액의 포토루미네선스를 측정된 결과, 443nm에 최대 강도를 갖는 발광 스펙트럼을 관측하였다.

[0147] 실시예 2

[0148] [예시 화합물 A20의 합성]

[0149] 먼저, 실시예 1에서 얻어진 A8 1.2g(3mmol) 및 N-브로모숙신이미드 0.534g(3mmol)을 아세트니트릴 50ml에 넣고, 생성된 혼합물을 60℃에서 8시간 동안 교반하였다. 냉각 후, 혼합물을 농축하여 고체를 얻었다. 고체를 컬럼 크로마토그래피(클로로포름/헵탄=1:4)에 의해 정제하고, 클로로포름/메탄올로 2회 재결정하여 E6 1.27g(수

율: 88%)을 얻었다. 다음으로, E6 0.96g(2mmol), 2,6-디메틸페닐보론산(E7) 330mg(2.2mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 0.05g, 톨루엔 20ml, 에탄올 10ml 및 2M 탄산나트륨 수용액 20ml을 100ml 가지형 플라스크에 첨가한 후, 질소 기류에서 80℃에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 용액을 실온으로 냉각시키고, 생성된 결정을 여과하고, 물, 에탄올 및 헵탄으로 분산 세척하였다. 생성된 결정을 톨루엔에 가열에 의해 용해시키고, 용액을 뜨거운 상태에서 여과하고, 톨루엔/에탄올로 재결정하였다. 결정을 120℃에서 진공 하에 건조시키고, 승화에 의해 정제하여 예시 화합물 A20 0.73g(수율: 72%)을 밝은 황색 결정으로서 얻었다.



[0150]

[0151] 또한, NMR 측정에 의해 이 화합물의 구조를 확인하였다.

$^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ , 500 MHz)  $\sigma$  (ppm): 8.75 (d, 1H,  $J = 7.10$  Hz), 8.67 (d, 1H,  $J = 7.70$  Hz), 8.06 (d, 1H,  $J = 6.60$  Hz), 7.99 (d, 1H,  $J = 6.60$  Hz), 7.73-7.63 (m, 6H), 7.58-7.48 (m, 4H), 7.42 (d, 1H,  $J = 8.20$  Hz), 7.27-7.24 (m, 1H), 7.18-7.13 (m, 3H), 6.81 (d, 1H,  $J = 7.25$  Hz), 1.94 (s, 6H).

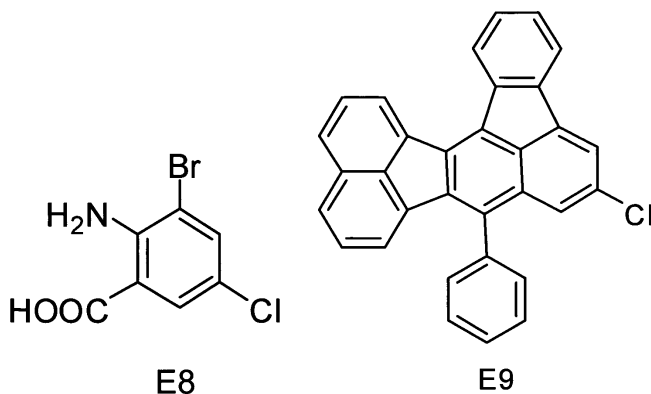
[0152]

[0153] 히타치 F-4500을 사용하여 350nm의 여기 파장에서 예시 화합물 A20의  $1 \times 10^{-5}$  mol/L 톨루엔 용액의 포토루미네센스를 측정할 결과, 449nm에 최대 강도를 갖는 발광 스펙트럼을 관측하였다.

[0154] 실시예 3

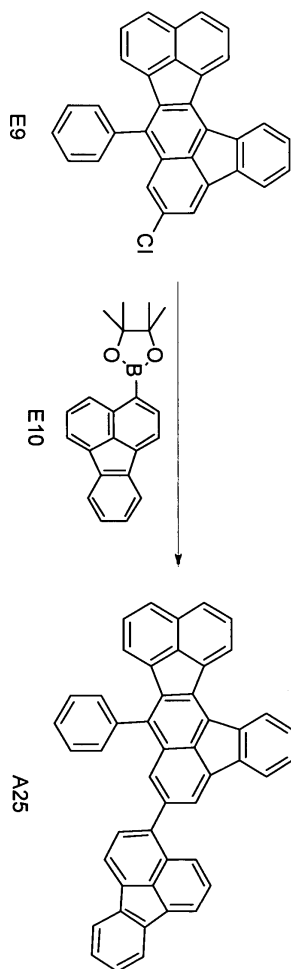
[0155] [예시 화합물 A25의 합성]

[0156] 실시예 1에서 사용된 유기 화합물 E4를 E8로 변경한 것을 제외하고는 실시예 1에서와 동일한 반응 및 정제에 의해 E9를 제조하였다.



[0157]

[0158] 먼저, E9 0.87g(2mmol), E10 0.72g(2.2mmol), 아세트산팔라듐 0.4mg, 2-디시클로헥실포스피노-2',6'-디메톡시비페닐 0.9mg, 톨루엔 5ml, 증류수 0.1ml 및 인산칼륨 1.27g을 30ml 가지형 플라스크에 충전한 후, 질소 기류에서 100℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 용액을 실온으로 냉각시키고, 생성된 결정을 여과하고, 물, 에탄올 및 헵탄으로 분산 세척하였다. 생성된 결정을 톨루엔에 가열에 의해 용해시키고, 용액을 뜨거운 상태에서 여과하고, 톨루엔/에탄올로 재결정하였다. 결정을 120℃에서 진공 하에 건조시키고, 승화에 의해 정제하여 예시 화합물 A25 0.96mg(수율: 80%)을 밝은 황색 결정으로서 얻었다.



[0159]

[0160] 또한, NMR 측정에 의해 이 화합물의 구조를 확인하였다.

$^1\text{H NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ , 500 MHz)  $\sigma$  (ppm): 8.78 (d, 1H,  $J = 7.05$  Hz), 8.71 (d, 1H,  $J = 7.75$  Hz), 8.05-7.78 (m, 10H), 7.63-7.48 (m, 8H), 7.41-7.37 (m, 4H), 7.28-7.26 (m, 1H), 6.75 (d, 1H,  $J = 8.50$  Hz).

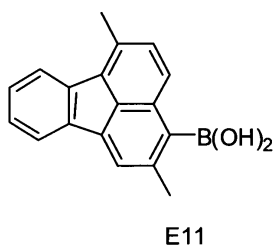
[0161]

[0162] 히타치 F-4500을 사용하여 350nm의 여기 파장에서 예시 화합물 A25의  $1 \times 10^{-5}$  mol/L 톨루엔 용액의 포토루미네센스를 측정 한 결과, 450nm에 최대 강도를 갖는 발광 스펙트럼을 관측하였다.

[0163] 실시예 4

[0164] [예시 화합물 A35의 합성]

[0165] 실시예 3에서 사용된 유기 화합물 E10을 E11로 변경한 것을 제외하고는 실시예 3에서와 동일한 방식으로 반응 및 정제를 행하였다.



[0166]

[0167] 또한, NMR 측정에 의해 이 화합물의 구조를 확인하였다.

$^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ , 500 MHz)  $\sigma$  (ppm): 8.79 (d, 1H,  $J = 7.10$  Hz), 8.71 (d, 1H,  $J = 7.75$  Hz), 8.03-7.96 (m, 5H), 7.90-7.80 (m, 3H), 7.62-7.48 (m, 8H), 7.40-7.36 (m, 4H), 7.28-7.26 (m, 1H), 6.75 (d, 1H,  $J = 8.50$  Hz), 2.85 (s, 3H), 2.44 (s, 3H).

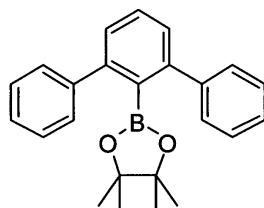
[0168]

[0169] 히타치 F-4500을 사용하여 350nm의 여기 파장에서 예시 화합물 A35의  $1 \times 10^{-5}$  mol/L 톨루엔 용액의 포토루미네센스를 측정할 결과, 447nm에 최대 강도를 갖는 발광 스펙트럼을 관측하였다.

[0170] 실시예 5

[0171] [예시 화합물 A23의 합성]

[0172] 실시예 3에서 사용된 유기 화합물 E10을 E12로 변경한 것을 제외하고는 실시예 3에서와 동일한 방식으로 반응 및 정제를 행하였다.



E12

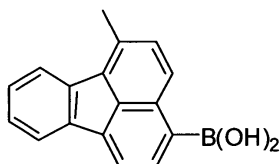
[0173]

[0174] 히타치 F-4500을 사용하여 350nm의 여기 파장에서 예시 화합물 A23의  $1 \times 10^{-5}$  mol/L 톨루엔 용액의 포토루미네센스를 측정할 결과, 449nm에 최대 강도를 갖는 발광 스펙트럼을 관측하였다.

[0175] 실시예 6

[0176] [예시 화합물 A34의 합성]

[0177] 실시예 3에서 사용된 유기 화합물 E10을 E13으로 변경한 것을 제외하고는 실시예 3에서와 동일한 방식으로 반응 및 정제를 행하였다.



E13

[0178]

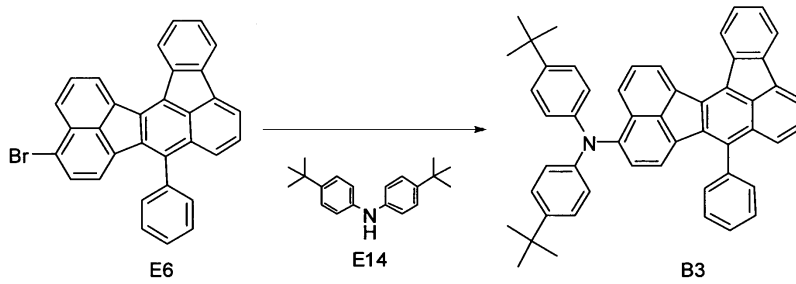
[0179] 히타치 F-4500을 사용하여 350nm의 여기 파장에서 예시 화합물 A34의  $1 \times 10^{-5}$  mol/L 톨루엔 용액의 포토루미네센스를 측정할 결과, 450nm에 최대 강도를 갖는 발광 스펙트럼을 관측하였다.

[0180] 실시예 7

[0181] [예시 화합물 B3의 합성]

[0182] 먼저, E6 0.96g(2mmol), E14 0.68g(2.4mmol), t-부톡시나트륨 0.38g(4mmol) 및 o-크실렌 30ml을 100ml 3구 플라스크에 넣고, 용액을 50°C로 가열하였다. 그 후, 이 용액에 o-크실렌 8ml 중 아세트산팔라듐 6mg 및 t-부틸포스핀 27mg의 용액을 천천히 적가한 후, 가열 환류 하에 6시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 물을 반응 용액에 첨가하고, 톨루엔으로 추출을 행하였다. 유기층을 물로 세척하고, 황산마그네슘 상에서 건조시키고, 용매를 감압 하에 증류에 의해 제거하였다. 잔류물을 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피(톨루엔/메탄올=9:1)에 의해

정제한 후, 톨루엔으로 재결정하였다. 생성된 결정을 120℃에서 진공 하에 건조시킨 후, 승화에 의해 정제하여 예시 화합물 B3 0.89g(수율: 65%)을 밝은 황색 결정으로서 얻었다.



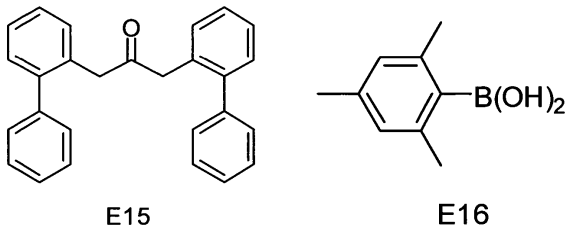
[0183]

[0184] 히타치 F-4500을 사용하여 350nm의 여기 파장에서 예시 화합물 B3의  $1 \times 10^{-5}$  mol/L 톨루엔 용액의 포토루미네센스를 측정할 결과, 495nm에 최대 강도를 갖는 발광 스펙트럼을 관측하였다.

[0185] 실시예 8

[0186] [예시 화합물 A50의 합성]

[0187] 실시예 1 및 2에서 사용된 유기 화합물 E2 및 유기 화합물 E7을 각각 E15 및 E16으로 변경한 것을 제외하고는 실시예 1에서와 동일한 방식으로 반응 및 정제를 행하였다.



[0188]

[0189] 히타치 F-4500을 사용하여 350nm의 여기 파장에서 예시 화합물 A50의  $1 \times 10^{-5}$  mol/L 톨루엔 용액의 포토루미네센스를 측정할 결과, 449nm에 최대 강도를 갖는 발광 스펙트럼을 관측하였다.

[0190] 실시예 9 내지 28

[0191] 이들 실시예 각각에서는, 다층 유기 발광 소자의 제5예로서의 소자(애노드/정공 주입층/정공 수송층/발광층/정공-여기자 블로킹층/전자 수송층/캐소드)를 형성하였다. 먼저, 유리 기판 상에 100nm의 ITO를 패터닝하였다. 그 후, ITO 기판 상에, 하기에 기재된 유기층 및 전극층을  $10^{-5}$ Pa의 진공 챔버 내에서 저항 가열 진공 증착에 의해 대향 전극 면적이  $3\text{mm}^2$ 가 되도록 연속적으로 형성하였다. 2종류의 게스트 재료가 존재하는 경우, 치환 위치가 상이한 구조 이성질체의 약 1:1 혼합물을 사용하였다.

[0192] 정공 수송층(30nm) G-1

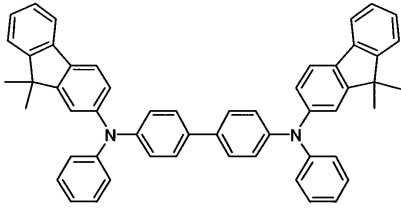
[0193] 발광층(30nm) 호스트 G-2, 게스트: 예시 화합물(중량비 5%)

[0194] 정공/여기자 블로킹층(10nm) G-3

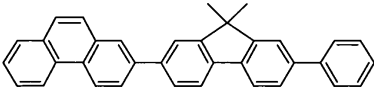
[0195] 전자 수송층(30nm) G-4

[0196] 금속 전극층 1(1nm) LiF

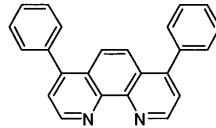
[0197] 금속 전극층 2(100nm) Al



G-1



G-3



G-4

[0198]

[0199] EL 소자의 특성과 관련하여, 전류-전압 특성은 휴렛 팩커드사(Hewlett-Packard Company) 제조의 미소전류계 4140B로 측정하고, 발광 휘도는 탑콘사(Topcon Corporation) 제조의 BM7로 측정하였다. 실시예 9 내지 28의 발광 효율 및 전압을 표 5에 나타낸다.

표 5

	게스트	G-2	발광 효율 (cd/A)	전압 (V)
실시예 9	A8	H10	4.8	4.5
실시예 10	A8	H21	4.5	4.5
실시예 11	A8	H22	4.0	4.2
실시예 12	A16	H4	4.5	4.9
실시예 13	A17	H8	3.5	4.2
실시예 14	A18	H2	4.9	4.5
실시예 15	A20	H22	4.7	4.2
실시예 16	A22	H17	4.2	4.6
실시예 17	A23	H21	4.9	4.6
실시예 18	A25	H10	5.5	4.9
실시예 19	A25	H22	5.6	4.5
실시예 20	A29	H5	4.5	4.8
실시예 21	A30	H23	6.5	4.5
실시예 22	A34	H27	5.5	4.5
실시예 23	A35	H10	4.8	4.2
실시예 24	A38	H26	5.0	4.6
실시예 25	A45	H16	4.9	4.5
실시예 26	A50	H4	4.6	4.9
실시예 27	B3	H8	12.5	4.2
실시예 28	B9	H21	4.3	5.1

[0200]

[0201]

실시예 29 내지 33

[0202]

이들 실시예 각각에서는, 제5예의 다층 유기 발광 소자를 형성하였다. 층 구성은 애노드, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층 및 캐소드를 이 순서대로 포함하였다.

[0203]

공진 구조를 갖는 유기 발광 소자를 하기 방법에 의해 형성하였다.

[0204]

지지 부재로서 기능하는 유리 기판 상에 알루미늄 합금(AlNd)을 스퍼터링법에 의해 100nm의 두께로 증착하여 반사성 애노드를 형성하였다. 또한, ITO를 스퍼터링법에 의해 80nm의 두께로 증착하여 투명성 애노드를 형성하였다. 다음으로, 애노드 주위에 아크릴 수지계의 소자 분리막을 1.5 $\mu$ m의 두께로 형성하고, 반경 3mm의 개구를 형성하였다. 기판을 아세톤 및 이소프로필 알코올(IPA)로 순서대로 초음파 세척하고, IPA로 비등 세척한 후, 건조시켰다. 또한, 기판의 표면을 UV/오존으로 세척하였다.

[0205]

또한, 하기에 기재된 유기층을 10<sup>-5</sup>Pa의 진공 챔버 내에서 저항 가열 진공 증착에 의해 연속적으로 형성하였다. 그 후, 캐소드로서의 IZO를 스퍼터링법에 의해 증착하여 30nm 두께의 투명성 전극을 형성하였다. 형성 후, 기판을 질소 분위기에서 밀봉하였다. 이에 의해, 유기 발광 소자를 형성하였다.

[0206]

정공 주입층(95nm) G-11

[0207]

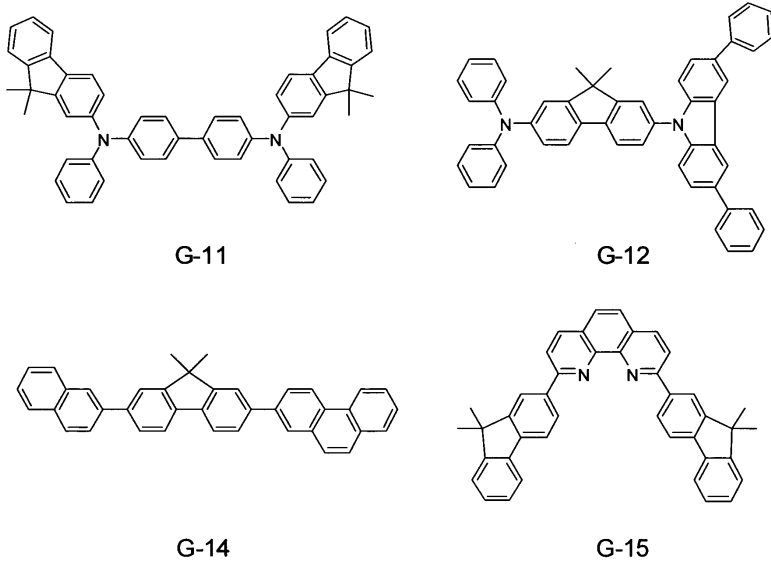
정공 수송층(10nm) G-12



[0208] 발광층(35nm) 호스트 G-13, 게스트: 예시 화합물(중량비 2%)

[0209] 전자 수송층(10nm) G-14

[0210] 전자 주입층(70nm) G-15(중량비 80%), Li(중량비 20%)



[0211]

[0212] EL 소자의 특성과 관련하여, 전류-전압 특성은 휴렛 팩커드사 제조의 미소전류계 4140B로 측정하고, 발광 휘도는 탐콘사 제조의 BM7로 측정하였다. 실시예 29 내지 33의 발광 효율 및 전압을 표 6에 나타낸다.

**표 6**

	게스트	G-13	발광 효율 (cd/A)	전압 (V)
실시예 29	A8	H9	3.0	4.0
실시예 30	A25	H10	3.1	4.2
실시예 31	A30	H21	3.5	4.5
실시예 32	A34	H4	3.4	4.2
실시예 33	A36	H18	3.1	4.3

[0213]

[0214] (결과 및 고찰)

[0215] 본 발명에 따른 유기 화합물은 높은 수율을 갖고 청색 발광에 적합한 신규 화합물이며, 유기 발광 소자에 사용하는 경우 양호한 발광 특성을 갖는 발광 소자를 제조할 수 있다.

[0216] 본 발명을 예시적인 실시형태를 참고로 설명하였지만, 본 발명은 개시된 예시적인 실시형태에 한정되지 않음을 이해해야 한다. 하기 특허청구범위는 이러한 변형 및 등가 구조 및 기능을 모두 포괄하도록 가장 넓게 해석되어야 한다.

[0217] 본 출원은 2009년 6월 30일에 출원된 일본 특허 출원 제2009-155667호에 대해 우선권을 주장하며, 상기 출원은 그 전문이 본원에 참고로 도입된다.

도면

도면1

